



TITLE:

高周期典型元素を含む新規結合様式の創出

AUTHOR(S):

水畑, 吉行

CITATION:

水畑, 吉行. 高周期典型元素を含む新規結合様式の創出. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2019, 2018: 2-2

ISSUE DATE:

2019-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/241131>

RIGHT:

高周期典型元素を含む新規結合様式の創出

Synthesis of Compounds Having Novel Bonds of Heavier Main Group Elements

京都大学化学研究所 物質創製化学研究系 有機元素化学研究領域 水畑 吉行

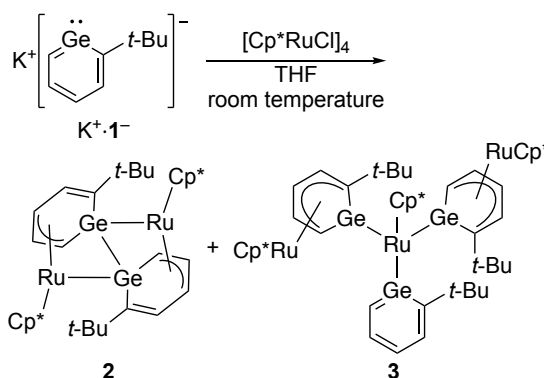
研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、筆者らがごく最近合成・単離することに成功したゲルマニウム核置換フェニルアニオン $K^+ \cdot 1^-$ の反応生成物の性質に関する検証を行った。

$K^+ \cdot 1^-$ と 0.25 当量の $[RuClCp^*]_4$ ($Cp^* = [C_5Me_5]$) との反応生成物を分離・精製したところ、錯体 **2** と **3** を単離することに成功した。X 線

結晶構造解析の結果から、これらの錯体は母体フェニルアニオンとは大きく異なる配位様式を示していることが明らかになった。

これらの結合・配位様式を明確化するために、以下の検証を行った。まず、得られた錯体の構造最適化を Gaussian 09 {B3PW91/LanL2DZ(Ge,Ru),6-31G(d)(C,H)} にて行い、最適化構造が X 線単結晶構造解析による実測値と極めて良い一致を示すことを確認した。その上で、NBO6.0 および AIMAll プログラムによる評価{B3PW91/TZVP(Ge,Ru),6-311++G(2df,2p)}を行った。その結果、図に示す配位形式での記述が妥当であることを明らかにした。



発表論文(謝辞あり)

- (1) Fujimori, S.; Mizuhata, Y.; Tokitoh, N. Heavy Phenyllithium and -Sodium: Synthesis and Characterization of Germanium Analogues of Phenyl Anion ('Germabenzenyl Anions'). *Chem. Lett.* **2018**, 47, 708–710.
- (2) Fujimori, S.; Mizuhata, Y.; Tokitoh, N. Ru-Complexes of an Anionic Germabenzenyl Ligand. *Chem. Commun.* **2018**, 54, 8044–8047.
- (3) Mizuhata, Y.; Fujimori, S.; Noda, N.; Kanetsato, S.; Tokitoh, N. Generation of Stannabenzenes and Their Monomer–Dimer Equilibration. *Dalton Trans.* **2018**, 47, 14436–14444.
- (4) Fujimori, S.; Mizuhata, Y.; Tokitoh, N. Stannabenzenylpotassium: The First Isolable Tin-Containing Benzene Derivative. *Chem. Eur. J.* **2018**, 24, 17039–17045.
- (5) Fujimori, S.; Mizuhata, Y.; Tokitoh, N. A Mixed-Anion System Consisting of a Germyl Anion and Anions Delocalized on Conjugated Carbon Ring Skeletons. *Chem. Eur. J.* in press.